

Mở đầu

Thiết kế thí nghiệm (Experimental Design) được sử dụng rộng rãi bởi các nhà phân tích với mục đích kiểm soát các nhân tố quan trọng trong việc mô tả hoặc giải thích kết quả đầu ra của thí nghiệm. Nó ra đời từ năm 1930 bắt nguồn từ những nghiên cứu của nhà thống kê R. A. Fisher tại trung tâm thí nghiệm nông học Rothamsted, Vương Quốc Anh. Những đóng góp quý báu của ông cùng với F. Yates và D. J. Finney là đã đưa ra nhiều bài toán trong nông nghiệp và sinh học. Những thập kỷ tiếp theo, gắn liền với sự phát triển của công nghiệp, G. E. P. Box và đồng nghiệp đã phát triển các kỹ thuật trước đó để phù hợp với các bài toán trong công nghệ hóa học.

Phương pháp bề mặt đáp ứng (Response Surface Methodology hoặc RSM) nghiên cứu sự phụ thuộc của biến đầu ra hay *biến đáp ứng* (response) y vào các giá trị x_1, \dots, x_m của m nhân tố (factor) đầu vào trong thí nghiệm dưới dạng $y = f(x_1, \dots, x_m) + \epsilon$. Hàm hồi quy biểu diễn mối quan hệ này là chưa biết và được xấp xỉ bởi hàm đa thức trong khai triển Taylor trên miền được giới hạn hay còn gọi là *miền thí nghiệm* (experimental region).

Nếu sử dụng hàm đa thức bậc một để xấp xỉ ta nhận được *mô hình đa thức bậc một* (first-order model)

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \epsilon. \quad (1)$$

Trong trường hợp sử dụng hàm đa thức bậc hai, *mô hình đa thức bậc hai* (second-order model) được biểu diễn dưới dạng

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon, \quad (2)$$

trong (1) và (2) ϵ là *nhiều trắng* (white noise).

Trong mô hình bề mặt đáp ứng, các giá trị của các nhân tố được thiết kế trong n phép thử (run) dưới dạng ma trận thiết kế D cỡ $n \times m$ gồm các hàng $(x_{u1}, x_{u2}, \dots, x_{um})$, $u = 1, \dots, n$. Ma trận thiết kế mở rộng \mathbf{X} của mô hình đa thức bậc hai với n hàng và $p = \frac{1}{2}(m+1)(m+2)$ cột $(1, x_1^2, \dots, x_m^2, x_1, \dots, x_m, x_1x_2, \dots, x_{m-1}x_m)$ nhận được từ ma trận thiết kế dùng để ước lượng p hệ số của mô hình bằng phương pháp bình phương tối thiểu thông thường (OLS) hoặc phương pháp bình phương tối thiểu tổng quát (GLS).

Các thiết kế cho mô hình bề mặt đáp ứng hay còn gọi là *thiết kế bề mặt đáp ứng* (response surface design hoặc RSD) phải thỏa mãn một trong các tiêu chí sau (xem mục 7.1 Meyer & Montgomery (2002)):

1. Đưa ra phân bố hợp lý về các biến đáp ứng trong *miền quan tâm* (region of interest) và phù hợp với mô hình.
2. Các phép thử thí nghiệm có thể chia nhóm được.
3. Đưa ra ước lượng sai số, ước lượng chính xác hệ số của mô hình và mô tả tốt sự thay đổi của phương sai dự báo $var(\hat{y}(\mathbf{x}))$ trong miền thí nghiệm.
4. Thiết kế có *tính vững* (robust) đối với các giá trị ngoại biên hoặc giá trị bị mất.
5. Thiết kế không yêu cầu quá nhiều phép thử thí nghiệm và nhiều mức giá trị cho các nhân tố.
6. Đảm bảo tính toán đơn giản, dễ giải thích mô hình.

Tuy nhiên, để tìm ra thiết kế thỏa mãn đồng thời tất các tiêu chí trên là không thể, ví dụ tiêu chí 1 và 5 không thể cùng đạt được do 1 cần thêm càng nhiều phép thử càng tốt. Vì vậy, mỗi bài toán tìm thiết kế thí nghiệm chỉ tập trung vào một số tiêu chí nhất định. Ví dụ ở tiêu chí 3, người ta thường xem xét các thiết kế dựa trên các tiêu chuẩn D -tối ưu (cực đại định thức của ma trận thông tin trong $var(\hat{y}(\mathbf{x}))$), G -tối ưu (cực tiểu giá trị lớn nhất của phương sai dự báo), A -tối ưu (cực tiểu vết của ma trận nghịch đảo của ma trận thông tin) và I -tối ưu (cực tiểu trung bình phương sai dự báo).

Dưới đây là các thiết kế thông dụng đáp ứng một số tiêu chí trên bao gồm:

- (i) Các thiết kế cho các nhân tố với 2-mức giá trị phổ biến là: thiết kế nhân tố (FD) 2^m , thiết kế một phần nhân tố (FFD) 2^{m-k} và thiết kế Plackett-Burman (PBD).
- (ii) Các thiết kế cho các nhân tố với 3-mức giá trị phổ biến là: Thiết kế tổng hợp trung tâm (CCD), thiết kế tổng hợp nhỏ (SCD), thiết kế Box-Behnken (BBD), thiết kế tăng cặp (APD).
- (iii) Thiết kế SPLIT-PLOT (SPD) là thiết kế khi xuất hiện các nhân tố khó thay đổi giá trị (HTC) và nhân tố dễ dàng thay đổi giá trị (ETC) do điều kiện kinh tế và thời gian.

Trong thời gian gần đây, các hướng nghiên cứu về thiết kế bề mặt đáp ứng tập trung chủ yếu theo các hướng sau:

- (i) Giảm số phép thử thí nghiệm mà vẫn không làm thay đổi nhiều về D -hiệu quả và các tính chất khác. Các kết quả này được công bố trong Draper & Lin (1990), Morris (2000), Nguyen & Borkowski (2008), Nguyen & Lin (2011), Dey (2009) và Nguyen & Dey (2013).
- (ii) Phát triển, tìm kiếm các thiết kế SPLIT-PLOT D -hiệu quả cho các thí nghiệm có nhân tố HTC và ETC. Các kết quả này được công bố trong Vinning et al. (2005), Parker et al. (2006, 2007), Macharia & Goos (2010), Jones & Goos (2012) và Mylonal et al. (2013).
- (iii) Phát triển các thiết kế sàng lọc xác định cho mô hình bề mặt đáp ứng chỉ gồm các hiệu ứng chính và hiệu ứng bậc hai. Các kết quả mới được công bố trong Jones & Nachtsheim (2011), Stylianou (2011), Xiao et al. (2012) và Nguyen & Stylianou (2013).

Theo hai hướng nghiên cứu đầu tiên, nội dung chính của luận án là nghiên cứu bài toán tìm thiết kế bề mặt đáp ứng 3-mức tối ưu theo các tiêu chí 2, 3, 5 và 6. Các thiết kế sẽ có (i) tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao, (ii) chia nhóm được và tối ưu theo chỉ số D_{eff} . Trong bài toán này chúng tôi xét các nhân tố với 3-mức giá trị vì nó là số mức bé nhất phù hợp với mô hình đa thức bậc hai và sẽ làm số phép thử thí nghiệm giảm so với trường hợp thí nghiệm nhiều hơn 3 mức. Tiêu chuẩn D -tối ưu được sử dụng trong luận án cũng rất phổ biến trong các công trình nghiên cứu về thiết kế thí nghiệm vì nó dễ dàng tính hơn các tiêu chuẩn khác như

I -tối ưu, A -tối ưu, ... Ngoài ra, một thiết kế là D -tối ưu thì cũng gần tối ưu theo một số tiêu chuẩn khác (xem Wong (1994) và Cornell (2011)). Kết quả chính của luận án là:

- (i) Thiết lập các thiết kế mặt đáp 3-mức có tính chất hiệu ứng trực giao cải tiến các thiết kế cổ điển Box-Behnken bằng cách sử dụng các thiết kế nhóm không đầy đủ (IBD). Các thiết kế Box-Behnken mới vẫn giữ nguyên các tính chất của thiết kế Box-Behnken cổ điển. Hơn thế nữa các thiết kế mới có số phép thử của thí nghiệm ít hơn BBD và có thể chia nhóm trực giao.
- (ii) Một thuật toán để xây dựng các SPD có tính chất ước lượng tương đương và tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao. Với thuật toán này, các thiết kế mới cải tiến một số lượng lớn các thiết kế cũ theo tiêu chuẩn chỉ số D_{eff} , các mức giá trị nguyên và tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao.

Các thiết kế mới của chúng tôi đóng góp vào tập hợp các thiết kế cho các người làm thí nghiệm giải quyết các bài toán thực tế.

Ngoài phần mở đầu, kết luận, danh mục công trình và tài liệu tham khảo, luận án bao gồm 3 chương

- **Chương 1:** Trình bày một số kiến thức về thiết kế thí nghiệm và tập trung giới thiệu phương pháp bề mặt đáp ứng.
- **Chương 2:** Trình bày về thiết kế Box-Behnken và xây dựng các BBD mới có số phép thử thí nghiệm ít hơn mà vẫn giữ nguyên các tính chất của thiết kế Box-Behnken.
- **Chương 3:** Trình bày về thiết kế SPLIT-PLOT và thiết kế ước lượng tương đương SPLIT-PLOT (EE-SPD). Các EE-SPD mới tạo ra bởi thuật toán SPLIT có tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao và D -hiệu quả.

Luận án có sử dụng các mô đun IBD, CIBD và CUT trong phần mềm Gendex của TS. Nguyễn Kỳ Nam (<http://designcomputing.net/gendex/>) và lập trình tính toán theo ngôn ngữ Java.

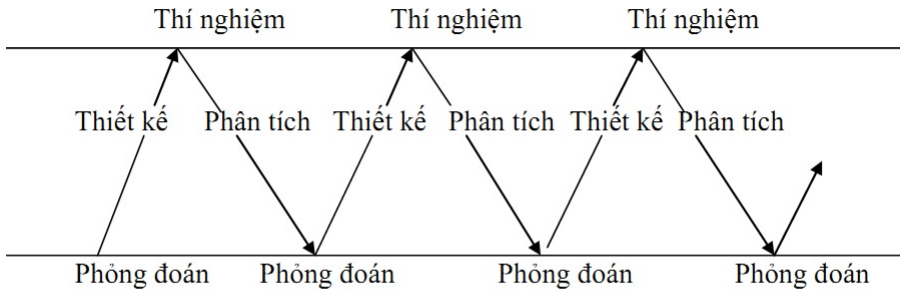
Chương 1. Giới thiệu phương pháp bề mặt đáp ứng

Trong chương này, chúng tôi trình bày khái niệm về thiết kế thí nghiệm, và tập trung giới thiệu về phương pháp bề mặt đáp ứng trong thiết kế thí nghiệm. Chúng tôi đưa ra mô hình, tiêu chuẩn D -tối ưu và các thiết kế phù hợp với mô hình.

1.1 Thiết kế thí nghiệm

Thí nghiệm (Experiment) gồm một phép thử hoặc một tập hợp các phép thử. Nhà thống kê Fisher đề xuất ba nguyên lý cơ bản của việc thiết lập thí nghiệm đó là (i) *ngẫu nhiên hóa* (randomization), (ii) *lặp lại nhiều lần* (replication) và (iii) *chia nhóm* (blocking).

Thiết kế thí nghiệm gồm bốn bước: (i) phỏng đoán, (ii) thiết kế, (iii) thí nghiệm và (iv) phân tích (xem hình 1.1).



Hình 1.1: Quá trình thực hiện thí nghiệm liên tiếp

Thiết kế thí nghiệm là hệ thống cấu trúc các phép thử được thực hiện trên các nhân tố đầu vào để xác định kết quả ở các biến đầu ra, trong đó

mỗi phép thử thí nghiệm là một tổ hợp các giá trị của nhân tố. Các nhân tố trong thí nghiệm là điều kiện trong quá trình thực hiện thí nghiệm có ảnh hưởng đến kết quả đầu ra và được thiết lập ở các mức tương ứng với miền giá trị. Kết quả đầu ra của thí nghiệm được gọi là biến đáp ứng (là biến phụ thuộc trong mô hình hồi quy). Các sai số thường gặp trong thí nghiệm thường được giả thiết là nhiễu trắng.

1.2 Phương pháp bề mặt đáp ứng

Phương pháp bề mặt đáp ứng là tập hợp các kỹ thuật được thực hiện để tìm giá trị tốt nhất của biến đáp ứng. Nếu giá trị tốt nhất hoặc các giá trị của biến đáp ứng đã biết đến, thì phương pháp này cho ta hiểu biết sâu hơn về hệ thống chung của biến đáp ứng.

1.2.1 Mô hình bề mặt đáp ứng

Trong thực tế, biến đáp ứng phụ thuộc vào giá trị của các nhân tố dưới dạng

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_m) + \epsilon, \quad (1.1)$$

trong đó hàm đáp ứng f chưa biết và sai số ϵ là sai số thí nghiệm được giả sử có phân bố chuẩn với trung bình 0 và phương sai σ^2 .

Nếu xấp xỉ hàm đáp ứng bằng đa thức bậc một thì

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \epsilon, \quad (1.2)$$

được gọi là mô hình đa thức bậc một, trong đó các hệ số β_i , $i = 1, 2, \dots, m$ được gọi là *hiệu ứng chính hoặc bậc một* (main hoặc first-order effect).

Nếu hàm đáp ứng được xấp xỉ bởi đa thức bậc hai thì mô hình

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon. \quad (1.3)$$

được gọi là mô hình đa thức bậc hai, trong đó các hệ số β_{ii} , $i = 1, \dots, m$ là các *hiệu ứng bậc hai* (quadratic effect) và β_{ij} , $i = 1, \dots, m$, $j =$

2, \dots , m , $i < j$ là các *hiệu ứng tương tác* (interaction effect) giữa nhân tố thứ i và thứ j .

Thực hiện thí nghiệm dưới dạng ma trận thiết kế

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}$$

và quan sát các giá trị biến đáp ứng y_u , $u = 1, \dots, n$ theo mỗi phép thử (x_{u1}, \dots, x_{um}) ta nhận được hệ phương trình sau

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_{ii}x_{ui}^2 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_{ui} + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \beta_{ij}x_{ui}x_{uj} + \epsilon_u. \quad (1.4)$$

Mô hình 1.4 được viết lại dưới dạng ma trận như sau:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.5)$$

trong đó $\mathbf{Y} = [y_1, \dots, y_n]'$, $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_n]'$ và ma trận thiết kế mở rộng $\mathbf{X}_{n \times p}$ gồm n hàng $(1, x_{u1}^2, \dots, x_{um}^2, x_{u1}, \dots, x_{um}, x_{u1}x_{u2}, \dots, x_{u, m-1}x_{um})$, với $u = 1, \dots, n$.

Vecto hệ số $\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \beta_{11}, \dots, \beta_{mm}, \beta_1, \dots, \beta_m, \beta_{12}, \dots, \beta_{m-1m}]'$ được ước lượng bằng phương pháp bình phương tối thiểu $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$, có ma trận hiệp phương sai $cov(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$.

1.2.2 Tối ưu bề mặt đáp ứng

Với mô hình đa thức bậc hai được kiểm định phù hợp với mối quan hệ giữa biến đáp ứng và các nhân tố, ta nhận được dự báo biến đáp ứng

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^m \hat{\beta}_i x_i + \sum_{i=1}^m \hat{\beta}_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \hat{\beta}_{ij} x_i x_j = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}, \quad (1.6)$$

trong đó $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)'$, $\mathbf{b} = (\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_m)'$ và ma trận đối xứng $\hat{\mathbf{B}}$ cỡ $m \times m$ có phần tử đường chéo là $\hat{\beta}_{ii}$ và các phần tử ở vị trí (i, j) là $\hat{\beta}_{ij}/2$. Điểm dừng của bề mặt đáp ứng

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{b}. \quad (1.7)$$

Nếu ma trận $\hat{\mathbf{B}}$ có tất cả các giá trị riêng đều âm thì điểm dừng là điểm cực đại của bề mặt đáp ứng. Nếu $\hat{\mathbf{B}}$ có tất cả các giá trị riêng dương thì điểm dừng là điểm cực tiểu của bề mặt đáp ứng. Trong trường hợp giá trị riêng của $\hat{\mathbf{B}}$ có một số âm và một số dương thì điểm dừng được gọi là điểm yên ngựa.

1.2.3 Thiết kế thí nghiệm phù hợp mô hình bề mặt đáp ứng

1.2.3.1 Thiết kế phù hợp mô hình đa thức bậc một

Các thiết kế phù hợp với mô hình đa thức bậc một thường được sử dụng là các thiết kế 2-mức giá trị cho các nhân tố làm cực tiểu phương sai của các hệ số hồi quy $\hat{\beta}_i$. Đây là các thiết kế có ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ dạng đường chéo, trong đó ma trận thiết kế mở rộng \mathbf{X} gồm các hàng $(1, x_{u1}, \dots, x_{um})$ với $u = 1, \dots, n$. Khi đó, các thiết kế được gọi là *thiết kế bậc một trực giao* (first-order orthogonal design). Chúng bao gồm thiết kế nhân tố 2^m hoặc thiết kế một phần nhân tố 2^{m-k} và thiết kế Plackett-Burman.

1.2.3.2 Thiết kế phù hợp mô hình đa thức bậc hai

Năm 1951, Box & Wilson đưa ra lớp các thiết kế tổng hợp trung tâm thực hiện cho các nhân tố với năm mức là $-\alpha, -1, 0, 1, \alpha$. Các phép thử thí nghiệm trong CCD gồm các phép thử của thiết kế nhân tố 2-mức, các *điểm sao* (star point) dạng $(0, \dots, \pm\alpha, \dots, 0)$ và các *điểm tâm* (center point) $(0, \dots, 0)$.

BBD được giới thiệu bởi Box & Behnken (1960) thực hiện cho các nhân tố với ba mức $-1, 0, 1$. Các thiết kế này được xây dựng bằng phương pháp chồng chất điểm lên các nhóm không đầy đủ (chi tiết ở chương 2).

Năm 2000, Morris đề xuất một lớp thiết kế mới cho các nhân tố 3-mức giá trị là APD. Các thiết kế này gồm các phép thử của thiết kế 2-mức giá

trị trực giao trong mô hình đa thức bậc một và các phép thử sinh ra từ các phép thử trên.

Các SCD là thiết kế cải tiến CCD bởi Draper & Lin (1990) và Nguyen & Lin (2011) bằng cách sử dụng ít các phép thử hơn cho thiết kế nhân tố 2-mức mà vẫn giữ nguyên các điểm sao và điểm tâm.

1.2.3.3 Chia nhóm cho thiết kế bề mặt đáp ứng

Thiết kế bậc hai chia thành các *nhóm trực giao* (orthogonal block) nếu thỏa mãn các điều kiện sau :

- Mỗi nhóm là một thiết kế bậc một trực giao. Nghĩa là: $\sum x_i = 0$; $\sum x_i x_j = 0$ trong mỗi nhóm.
- Với mỗi nhân tố, tổng bình phương từ mỗi nhóm tỷ lệ với kích cỡ của nhóm. Nghĩa là : $\frac{\sum_{i=1}^{n_l} x_i^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2} = \frac{n_l}{n}$, với n_l là kích cỡ của nhóm thứ l , $l = 1, \dots, b$ và n là số phép thử thí nghiệm của thiết kế.

1.2.3.4 Thiết kế tối ưu cho mô hình bề mặt đáp ứng

Thiết kế bề mặt đáp ứng được gọi là D -tối ưu nếu giá trị định thức $|\mathbf{X}'\mathbf{X}|$ là cực đại. Với các thiết kế bất kỳ, chỉ số D_{eff} hay mức độ D -hiệu quả (D -efficiency) được xác định để đánh giá mức độ gần tối ưu:

$$D_{\text{eff}} = \left(\frac{|\mathbf{X}'\mathbf{X}|}{|\mathbf{M}_{\text{opt}}|} \right)^{1/p} \quad (1.8)$$

trong đó, $|\mathbf{M}_{\text{opt}}|$ là định thức của thiết kế tối ưu và p là số tham số trong mô hình.

1.3 Thí nghiệm sinh tổng hợp enzym Lipase

Trong mục này, chúng tôi trích dẫn thí nghiệm sinh tổng hợp enzym Lipase trong bài báo của tác giả Bui & Nguyen (2009) và tiến hành phân tích bằng phương pháp bề mặt đáp ứng sử dụng phần mềm R với gói lệnh `rsm` (<http://cran.r-project.org/web/packages/rsm/index.html>).

Chương 2. Thiết kế Box-Behnken nhỏ với nhóm trực giao

Trong chương này, một phương pháp mới xây dựng các thiết kế bậc hai với 3-mức sử dụng các thiết kế nhóm không đầy đủ với cỡ nhóm khác nhau được đề nghị với số nhân tố bất kỳ. Phương pháp này đưa ra các thiết kế có thể chia nhóm trực giao với số lượng nhỏ các phép thử thí nghiệm, mức độ *D-hiệu quả* (*D-efficiencies*) cao và chỉ số *xoay quanh* (*rotatability*) cao. Kết quả mới được công bố trong bài báo [1] của danh mục công trình khoa học của tác giả.

2.1 Thiết kế Box-Behnken

Box & Behnken (1958, 1960) giới thiệu các *thiết kế bậc hai* (second-order design hoặc SOD) phù hợp với mô hình đa thức bậc hai

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_{ii}x_i^2 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \beta_{ij}x_i x_j + \epsilon_u. \quad (2.1)$$

Các thiết kế này gọi là thiết kế Box-Behnken (viết tắt là BBD) được xây dựng từ các *thiết kế nhóm không đầy đủ và cân bằng* (Balanced Incomplete Block Design hoặc BIBD) hoặc các *thiết kế nhóm không đầy đủ và bán cân bằng* (Partial Balance Incomplete Block Design hoặc PBIBD) và thiết kế nhân tố 2-mức (hoặc một nửa thiết kế nhân tố 2-mức đối với trường hợp của BBD cho 11 nhân tố) được chồng chất lên các phần tử trong mỗi nhóm của BIBD hoặc PBIBD.

BBD có nhiều tính chất tốt như thiết kế có ba mức giá trị, mỗi nhân tố được thực hiện ở cùng mức giá trị cao nhất và nhỏ nhất, có tính chất xoay quanh hoặc gần xoay quanh và có thể chia nhóm trực giao trừ trường hợp ba và 11 nhân tố. Ngoài ra, ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ của các BBD có cấu trúc đơn giản. Cụ thể, trong khi các thiết kế bậc hai như APD và CCD có ma

trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ dạng

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

với \mathbf{A} là ma trận vuông cấp $m + 1$ và \mathbf{B} là ma trận vuông cấp $m + \binom{m}{2} = m(m + 1)/2$, thì các BBD (trừ trường hợp BBD cho 11 nhân tố) và CCD có ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ dạng

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

với \mathbf{D} là ma trận đường chéo. Khi ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ của thiết kế có dạng 2.2 thì hiệu ứng bậc hai sẽ trực giao với các hiệu ứng chính và hiệu ứng tương tác. Hơn nữa, m hiệu ứng chính và $\binom{m}{2}$ hiệu ứng tương tác trong 2.1 có thể ước lượng một cách trực giao nếu ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ có dạng 2.3.

2.2 Thiết kế nhóm không đầy đủ với cỡ nhóm khác nhau

Thiết kế nhóm không đầy đủ (IBD) cỡ (ν, b, r) là sự sắp xếp của ν phần tử vào b nhóm với kích thước khác nhau sao cho mỗi phần tử xuất hiện trong r nhóm và không phần tử nào xuất hiện nhiều hơn một lần trong mỗi nhóm. Kích cỡ của các nhóm có thể bằng nhau hoặc khác nhau. Khi các nhóm có thể chia thành các *nhóm lặp lại* (replicate set) thì thiết kế nhóm không đầy đủ được gọi là *tách được* (resolvable).

Mỗi IBD gắn liền với *ma trận lặp lại* (concurrency matrix) $\mathbf{N}\mathbf{N}' = (\lambda_{ij})$ với $\lambda_{ii} = r$, $(i = 1, \dots, \nu)$ và λ_{ij} ($i \neq j$) là số nhóm xuất hiện đồng thời phần tử i và j . BIBD là IBD với cỡ nhóm không đổi và $\lambda_{ij} = \lambda \forall i \neq j$.

Chúng tôi đề nghị một phương pháp xây dựng các IBD với hai giá trị $\lambda_{ij} = 1$ và 2: *Các thiết kế nhóm không đầy đủ này được xây dựng bằng cách thêm một hay hai phần tử hoặc xóa đi một phần tử từ thiết kế nhóm không đầy đủ và cân bằng.*

2.3 Phương pháp xây dựng thiết kế Box-Behnken nhỏ

Thiết kế Box-Behnken nhỏ (Small Box-Behnken design hoặc SBBD) được xây dựng bằng cách chồng chất các thiết kế nhân tố 2-mức lên các

Bảng 2.1: Các chỉ số của SBBD.

m	p	(v, b, r)	$n + n_0$	D_{eff}	Q^*
$4^{a,b}$	15	(4,6,3)	24+3	98.86	1.0000
5^b	21	(5,8,4)	34+2	72.44	0.9933
6^b	28	(6,11,5)	44+2	85.50	0.9967
$7^{a,b}$	36	(7,7,3)	56+2	99.93	1.0000
8	45	(8,20,7)	80+2	88.77	0.9972
9^a	55	(9,12,4)	96+4	98.18	0.9985
10	66	(10,15,5)	120+2	69.21	0.9947
11	78	(11,19,6)	152+2	74.90	0.9905
12	96	(12,22,7)	176+2	90.06	0.9973
13^a	105	(13,13,4)	208+2	99.11	0.9990
15	136	(15,35,9)	280+2	90.52	0.9964
16^a	153	(16,20,5)	320+5	96.83	0.9974

^a Các thiết kế được đưa ra bởi các tác giả khác

^b Các thiết kế có thể chia nhóm bởi hai *nhân tố chia nhóm* (blocking factor)

phần tử trong mỗi nhóm của thiết kế nhóm không đầy đủ. Với trường hợp SBBD cho 11 nhân tố, một nửa của thiết kế nhân tố 2^4 được sử dụng. Cụ thể, SBBD cho năm, sáu nhân tố được tạo từ các IBD tương ứng cỡ $(v, b, r) = (5, 8, 4)$ và $(v, b, r) = (6, 11, 5)$. Tương tự, ma trận biểu diễn SBBD cho $m = 8, 12$ và 15 nhân tố có thể đạt được bằng cách xóa đi cột cuối cùng trong các ma trận biểu diễn SBBD cho $m + 1$ nhân tố.

Các IBD gắn liền các SBBD cho 10 và 11 nhân tố được tạo nên bằng cách thêm một và hai phần tử vào BIBD cỡ $(v, b, r) = (9, 12, 4)$. Chúng tôi không tìm được IBD gắn với ma trận biểu diễn SBBD cho 14 nhân tố.

Bảng 2.2: Số phép thử thí nghiệm của các thiết kế chia nhóm trực giao^a

m	BBDs	DK	SBBD
5	42 (2)	42 (2)	34 (2)
6	50 (2)	51 (3)	46 (2)
7	58 (2)	-	-
8	-	65 (5)	82 (2)
9	100 (4)	65 (5)	-
10	162 (2)	82 (2)	122 (2)
11	-	90 (2)	154 (2)
12	194 (2)	-	178 (2)

^a Số nhóm trực giao nằm trong dấu ngoặc (mỗi nhóm có một điểm tâm)

2.4 Thiết kế Box-Behnken nhỏ mới với các nhóm trực giao

Bảng 2.1 liệt kê các chỉ số D_{eff} và Q^* của SBBD, trong đó các thiết kế cho 4 và 7 nhân tố đã được đưa ra bởi Box & Behnken (1960), các thiết kế cho 9, 13 và 16 nhân tố được đưa ra một cách độc lập bởi Crosier (1991) và Nguyen & Borkowski (2008). Chúng tôi tìm ra được bảy thiết kế mới ở trong bảng 2.1 gồm các SBBD cho 5, 6, 8, 10, 11, 12 và 15 nhân tố. Chỉ số D_{eff} của các SBBD này là trong khoảng từ 70% đến 90%, ngang bằng với các thiết kế của Dey & Koley (2013). Chỉ số xoay quanh Q^* của các SBBD là lớn hơn 0.99.

Bảng 2.2 thể hiện số phép thử thí nghiệm và số nhóm trực giao của các thiết kế Box-Behnken, các thiết kế DK và các SBBD của chúng tôi với số nhân tố m lên tới 12. Với mỗi m , chỉ có các thiết kế DK với số phép thử thí nghiệm ít nhất được đưa ra để so sánh. Dễ thấy rằng với $m = 5$ và 6, SBBD của chúng tôi có số phép thử thí nghiệm ít nhất. Tuy nhiên, ở trường hợp 8-11 nhân tố, số phép thử thí nghiệm của Dey & Koley (2013) là ít nhất. Vì thế, khi tìm kiếm các thiết kế bậc hai 3-mức có thể chia nhóm trực giao cho 8-11 nhân tố với nguồn tài nguyên hạn chế người làm

thí nghiệm nên xem xét kỹ lưỡng việc dùng các thiết kế DK mặc dù ma trận $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ của các thiết kế DK chỉ có dạng 2.2 chứ không có dạng 2.3.

2.5 Chia nhóm trực giao của các thiết kế bậc hai dựa trên IBD

Các SBBD cho $m = 5, 6, 8, 10, 11, 12$ và 15 được chia thành hai nhóm trực giao bởi chương trình CUT (xem Nguyen (2001), <http://designcomputing.net/gendex/cut/>). Các SBBD cho bốn đến bảy nhân tố có thể chia nhóm trực giao bởi hai nhân tố chia nhóm (ví dụ, các hàng và cột hay các ngày và khay) bằng chương trình CUT.

2.6 Kết luận chương 2

Chương này trình bày cấu trúc của 12 thiết kế bậc hai 3-mức dựa trên IBD. Chúng tôi tìm ra bảy SBBD mới cho $m = 5, 6, 8, 10, 11, 12$ và 15 nhân tố xây dựng từ IBD với cỡ nhóm không bằng nhau. Các SBBD này chưa từng được công bố. Thiết kế cho 15 nhân tố dựa trên IBD không xuất hiện trong Box & Behnken (1958, 1960) cũng như Nguyen & Borkowski (2008). Sáu thiết kế còn lại có số phép thử thí nghiệm nhỏ hơn hẳn các thiết kế của các tác giả trên và có chỉ số xoay quanh cao và không có nhiều sự khác biệt về chỉ số D_{eff} . Tất cả các thiết kế có thể chia nhóm trực giao. Các thiết kế với $m \leq 7$ nhân tố có thể chia nhóm trực giao bởi hai nhân tố chia nhóm. Các thiết kế này có thể tìm được trên trang <http://designcomputing.net/blockedSBBD/> cùng với các thiết kế của Dey & Kole (2013) cho phép người làm thí nghiệm linh hoạt trong việc lựa chọn các thiết kế bậc hai 3-mức có thể chia nhóm trực giao.

Chương 3. Thiết kế ước lượng tương đương

SPLIT-PLOT

Nhiều thí nghiệm công nghiệp được thực hiện theo *thiết kế SPLIT-PLOT bậc hai* (Second-order Split-Plot Design hoặc SPD). Các thí nghiệm gồm hai loại nhân tố: *nhân tố ô lớn* (Whole-Plot hoặc WP factor) và *nhân tố ô nhỏ* (Sub-Plot hoặc SP factor). Nhân tố WP hay còn được gọi là *nhân tố khó thay đổi* (Hard-to-Change hoặc HTC factor) là các nhân tố có mức giá trị khó hoặc tốn kém để thay đổi. Nhân tố SP hay còn gọi là *nhân tố dễ thay đổi* (Easy-to-Change hoặc ETC factor) là các nhân tố có mức giá trị dễ hoặc không tốn kém để thay đổi. Trong các thí nghiệm SPLIT-PLOT, các nhân tố WP được đồng nhất với các *nhóm* (block). Một số SPD có tính chất *ước lượng tương đương* (equivalent-estimation), nghĩa là các ước lượng của các tham số mô hình theo phương pháp *bình phương tối thiểu thông thường* (Ordinary Least Square) tương đương với phương pháp *bình phương tối thiểu tổng quát* (Generalized Least Square). Trong chương này, chúng tôi mô tả một thuật toán nhanh và đơn giản tạo ra các SPD *D*-hiệu quả có tính chất ước lượng tương đương bằng cách hoán đổi các mức giá trị của nhân tố SP trong mỗi ô lớn. Kết quả của thuật toán này được đánh giá với 111 SPD trong Macharia & Goos (2010) và Jones & Goos (2012). Các kết quả mới được công bố trong bài báo [2] trong danh mục công trình của tác giả.

3.1 Thiết kế SPLIT-PLOT

Năm 2005, Vining et al. đưa ra các *thiết kế ước lượng tương đương SPLIT-PLOT bậc hai* (Equivalent-Estimation Second-order Split-Plot Design hoặc EE-SPD) dựa trên thiết kế Box-Behnken và thiết kế tổng hợp trung tâm. Nghiên cứu này tiếp tục được phát triển bởi Parker et al. (2006, 2007). Năm 2006, Goos đã chỉ ra rằng các thiết kế EE-SPD dựa trên BBD và CCD có thể không thu hút sự quan tâm của người dùng vì nó có chỉ số D_{eff} thấp. Năm 2010, Macharia & Goos đã khai thác mối quan hệ giữa các SPD *D*-*tối ưu* (*D*-optimal) với các EE-SPD cho mô hình bề mặt đáp ứng

bậc hai và đề xuất thuật toán sinh ra các EE-SPD D -hiệu quả cho số nhân tố WP và SP, số ô lớn và cỡ ô tùy ý. Họ xem xét 111 trường hợp xây dựng SPD và chỉ ra 86 trường hợp là EE-SPD. Năm 2012, Jones & Goos (gọi tắt là JG) đưa ra một thuật toán để cải tiến và tìm ra 60 EE-SPD trong 111 trường hợp mà Macharia & Goos (2012) không tìm được EE-SPD hoặc EE-SPD có chỉ số D_{eff} chưa cao.

3.2 Mô hình bề mặt đáp ứng cho thiết kế SPLIT-PLOT tổng quát

Mô hình tổng quát cho dữ liệu nhận được từ thí nghiệm SPLIT-PLOT cho m_W nhân tố WP, m_S nhân tố SP được thực hiện trong b ô lớn có kích cỡ k ($bk = n$) là

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (3.1)$$

trong đó $\mathbf{Y}_{n \times 1}$ là vecto các giá trị của biến đáp ứng, $\mathbf{X}_{n \times p}$ là ma trận thiết kế mở rộng của mô hình đa thức bậc hai cho $m(= m_W + m_S)$ nhân tố và $p = (m + 1)(m + 2)/2$ là số tham số trong phương trình 3.1, $\boldsymbol{\beta}_{p \times 1}$ là vecto hệ số chứa p hiệu ứng tất định (fixed effect). Ma trận $\mathbf{Z}_{n \times b}$ là ma trận các phần tử 0 và 1 chứa b biến giả gắn liền với b ô lớn, vecto $\boldsymbol{\gamma}_{b \times 1}$ gồm b hiệu ứng ngẫu nhiên (random effect) của b ô lớn và vecto $\boldsymbol{\epsilon}_{n \times 1}$ là vecto của các sai số ngẫu nhiên. Hai vecto $\boldsymbol{\gamma}$ và $\boldsymbol{\epsilon}$ được giả thiết là không tương quan, có vecto trung bình $\mathbf{0}$ và ma trận hiệp phương sai đơn vị tương ứng là $\sigma_\gamma^2 \mathbf{I}_b$ và $\sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_n$, trong đó \mathbf{I}_b và \mathbf{I}_n là ma trận đơn vị có cỡ tương ứng là b và n . Khi đó, ma trận hiệp phương sai của mô hình có dạng

$$\mathbf{V} = \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_n + \sigma_\gamma^2 \mathbf{Z}\mathbf{Z}' = \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_n + \sigma_\gamma^2 \mathbf{J}_b, \quad (3.2)$$

trong đó

$$\mathbf{J}_b = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_{k \times k} & \mathbf{0}_{k \times k} & \cdots & \mathbf{0}_{k \times k} \\ \mathbf{0}_{k \times k} & \mathbf{J}_{k \times k} & \cdots & \mathbf{0}_{k \times k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0}_{k \times k} & \mathbf{0}_{k \times k} & \cdot & \mathbf{J}_{k \times k} \end{pmatrix}.$$

Ở đây $\mathbf{J}_{k \times k}$ là ma trận cỡ $k \times k$ gồm các phần tử 1 và $\mathbf{0}_{k \times k}$ là ma trận cỡ $k \times k$ gồm các phần tử 0.

Một EE-SPD là SPD có ước lượng bình phương tối thiểu thông thường và tổng quát là giống nhau, nghĩa là $\hat{\beta}_{OLS} = \hat{\beta}_{GLS}$ trong đó $\hat{\beta}_{OLS} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}$ và $\hat{\beta}_{GLS} = (\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y}$.

Tính chất ước lượng tương đương này được biến đổi về dạng đơn giản

$$\mathbf{C}'\mathbf{C} = k\mathbf{B} - \mathbf{B}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{B}, \quad (3.5)$$

trong đó $\mathbf{B} = \mathbf{X}'\mathbf{J}_b\mathbf{X}$ và $\mathbf{C} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}')\mathbf{J}_b\mathbf{X}$. Chúng tôi dùng phương trình 3.5 để nâng cao tốc độ tính toán của $\text{trace}(\mathbf{C}'\mathbf{C})$.

3.3 Cấu trúc mong muốn của ma trận thông tin của SPD

Thực hiện phân hoạch ma trận thông tin $\mathbf{M} = \mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}$ thành

$$\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \hline \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{array} \right). \quad (3.6)$$

trong đó ma trận con \mathbf{M}_{11} cỡ $(1 + m + m_W) \times (1 + m + m_W)$. Nếu 3.6 có thể viết dưới dạng

$$\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{array} \right). \quad (3.7)$$

trong đó \mathbf{D} là ma trận đường chéo, thì thiết kế SPLIT-PLOT được ký hiệu là SPD*. Phương trình 3.7 suy ra rằng, đối với mỗi SPD* m_S hiệu ứng chính của nhân tố SP và $\binom{m}{2}$ hiệu ứng tương tác trong SPD có thể ước lượng trực giao.

Trong chương này, chúng tôi phát triển thuật toán tìm các EE-SPD D -hiệu quả trong lớp các SPD có ma trận thông tin dạng 3.7 hoặc gần có dạng này.

3.4 Thuật toán SPLIT

Giả sử rằng $\sigma_\gamma^2 = \sigma_\epsilon^2 = 1$, ta sẽ nhận được ma trận hiệp phương sai của mô hình $\mathbf{V} = \mathbf{I}_n + \mathbf{J}_b$ và $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{I}_n - \frac{1}{k+1}\mathbf{J}_b$. Đặt $\mathbf{A} = \mathbf{X}'\mathbf{X}$, khi đó \mathbf{A} có thể biểu diễn dưới dạng tổng liên tiếp sau $\sum_{r=1}^b \mathbf{A}_r$, trong đó $\mathbf{A}_r = \sum_{u=1}^k \mathbf{x}'_u \mathbf{x}_u$ và \mathbf{x}_u là hàng thứ u của \mathbf{X}_r (ma trận con cỡ $k \times p$ của \mathbf{X} gắn liền với ô lớn thứ r).

Một cách tương tự, ma trận $\mathbf{B} = \mathbf{X}'\mathbf{J}_b\mathbf{X}$ có thể được viết thành tổng liên tiếp $\sum_{r=1}^b \mathbf{B}_r$, trong đó $\mathbf{B}_r = \mathbf{w}'_r \mathbf{w}_r$ và \mathbf{w}_r là vecto cỡ $1 \times p$ chứa tổng mỗi cột của \mathbf{X}_r . Vì vậy, \mathbf{M} có thể biểu diễn như sau:

$$\mathbf{M} = \sum_{r=1}^b \left(\mathbf{A}_r - \frac{1}{k+1} \mathbf{B}_r \right) \quad (3.8)$$

Nếu như ô lớn thứ r bị lấy đi hoặc được thêm vào SPD thì \mathbf{M} có thể được cập nhật như sau:

$$\mathbf{M}_{\text{updated}} = \mathbf{M} \mp \left(\mathbf{A}_r - \frac{1}{k+1} \mathbf{B}_r \right). \quad (3.9)$$

Công thức cập nhật ma trận thông tin 3.9 rất quan trọng trong chương trình xây dựng các SPD. Nếu không có công thức này, các ma trận sẽ phải tính toán lại mỗi khi thay đổi trong ma trận thiết kế.

Thuật toán SPLIT của chúng tôi dựa trên các kết quả cập nhật ma trận thông tin ở trên và gồm các bước sau:

1. Xây dựng thiết kế đầu vào \mathbf{D}_0 : ma trận thiết kế cỡ $n \times m$ với m_W nhân tố WP và m_S nhân tố SP trong n phép thử thí nghiệm.
2. Xây dựng thiết kế khởi tạo \mathbf{D} cỡ $n \times m$ bằng cách ngẫu nhiên hóa các mức của mỗi nhân tố SP trong mỗi mức của nhân tố WP trong \mathbf{D}_0 . Tính toán ma trận thông tin \mathbf{M} theo phương trình 3.8 và hàm mục tiêu f bằng tổng bình phương các phần tử trong \mathbf{M}_{12} và các phần tử ở trên đường chéo của ma trận \mathbf{M}_{22} (xem phương trình 3.6).
3. Lấy đi ô lớn thứ r , $r = 1, \dots, b$ từ \mathbf{D} và cập nhật \mathbf{M} theo 3.9. Trong số các nhân tố SP j , $j = 1, \dots, m_S$ trong ô lớn đã rút ra, tiến hành

Bảng 3.2: Các bước thuật toán SPLIT tạo ra EE-SPD cho trường hợp 25†(một nhân tố WP và hai nhân tố SP trong năm ô lớn cỡ ba)

(1)			(2)			(3)			(3')		
w	s_1	s_2	w	s_1	s_2	w	s_1	s_2	w	s_1	s_2
1	-1	-1	1	0	0	1	0	<u>-1</u>	1	0	-1
1	0	0	1	-1	-1	1	-1	<u>0</u>	1	-1	<u>1</u>
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	<u>0</u>
1	-1	-1	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0
1	0	0	1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1
1	1	1	1	0	1	1	0	1	1	0	1
-1	-1	-1	-1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	-1
-1	0	0	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
-1	1	1	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	0
-1	-1	-1	-1	-1	0	-1	-1	0	-1	-1	0
-1	0	0	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
-1	1	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1
0	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	1	0	1	1	0	1	1
0	1	1	0	-1	-1	0	-1	-1	0	-1	-1

†Xem bảng 5 trong Jones & Goos (2012). Các ô lớn cách ra một dòng. Các bước đổi ở (3) và (3') được gạch dưới.

tìm kiếm cặp mức giá trị sao cho khi đổi chỗ hai mức trong ô lớn này thì sẽ nhận được f nhỏ hơn (khi đó ô lớn sẽ được trả về \mathbf{D} sau khi đổi chỗ). Nếu tìm được, cập nhật f , \mathbf{D} và \mathbf{M} theo phương trình 3.9. Nếu f không giảm được thì lặp lại bước này với ô lớn tiếp theo.

Bước 3 được lặp lại cho đến khi $f = 0$ (nghĩa là \mathbf{D} trở thành SPD*) hoặc f không thể giảm hơn được nữa khi đổi chỗ các phần tử.

3.5 Kết quả và đánh giá

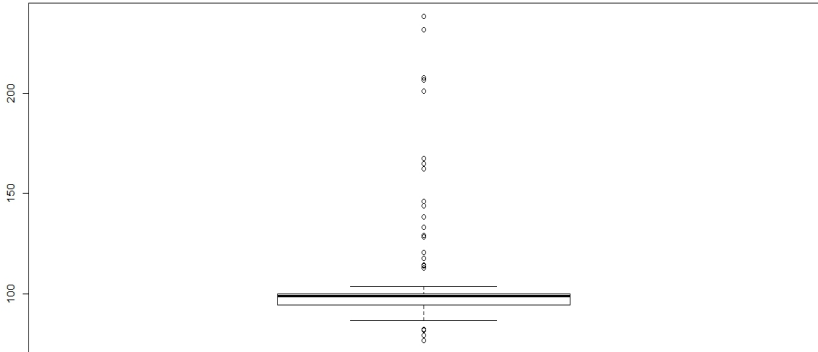
3.5.1 Các ví dụ minh chứng

Bảng 3.3 trình bày EE-SPD* dựa trên CCD của Vining et al. (2005) trong 12 ô lớn cỡ bốn cho 2 nhân tố WP và 2 nhân tố SP. Trong số 48 phép thử thí nghiệm, mỗi nhân tố WP được thực hiện 24 lần ở mức trung tâm 0 còn mỗi nhân tố SP được thực hiện 30 lần ở mức 0. Chỉ số D_{eff} tính theo SPD D -tối ưu trong bảng 10 trong bài báo của Jones & Nachtsheim (2009)

(xem bảng 3.3) là 58.2%. Thiết kế thứ 2 trong bảng 3.3 là EE-SPD* tạo ra bởi SPLIT. Mỗi nhân tố trong thiết kế mới này có tám lần thực hiện ở mức trung tâm 0 và có chỉ số $D_{\text{eff}}=88.9\%$ tính theo cùng SPD D -tối ưu trên. Một điểm nổi bật của thiết kế mới là nó có các thiết lập mức giá trị cho nhân tố WP giống hệt thiết kế SPD D -tối ưu.

3.5.2 Kết quả tính toán

Jones & Goos (2012) tìm được các EE-SPD trong tất cả 111 trường hợp, trong đó 24 trường hợp có mức giá trị không nguyên (11 trường hợp liệt kê trong bảng 5 của JG). Sử dụng SPLIT, chúng tôi tìm được 105 EE-SPD bao gồm cả 24 trường hợp không nguyên của JG. Trong sáu trường hợp SPLIT không tìm được EE-SPD có năm trường hợp có các ô lớn cỡ hai.



Hình 3.1: Đồ thị hộp ria mè cho tỷ số tương đối giữa mức độ D —hiệu quả của thiết kế từ SPLIT và JG

Để so sánh hiệu quả của thiết kế mới và thiết kế của JG, chúng tôi tính toán *tỷ số tương đối* (Relative efficiency hoặc RE) (%) của mỗi EE-SPD mới bằng tỷ số chỉ số D_{eff} giữa EE-SPD mới với của JG. Đồ thị *hộp ria mè* (Box-Plot) của RE cho 105 trường hợp được mô tả trong hình 3.1. Từ đồ thị, ta dễ nhận thấy có 2 EE-SPD với RE nhỏ hơn 80% còn lại là trên 90%. Bảng 3.7 liệt kê 25 trường hợp có RE lớn hơn 100%. Các

Bảng 3.3: Ba SPD cho thí nghiệm độ chịu lực của ống gồm: EE-SPD* dựa trên CCD, EE-SPD* tạo bởi SPLIT và SPD D-tối ưu†

CCD-SPD				SPLIT-SPD				SPD D-tối ưu			
w_1	w_1	s_1	s_2	w_1	w_2	s_1	s_2	w_1	w_2	s_1	s_2
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1
-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1
-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1
-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1
-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1
-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
-1	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1
1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1
1	-1	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1
1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1
1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1
1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	-1
1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1
1	1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	1	-1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
-1	0	0	0	-1	-1	0	-1	-1	-1	-1	1
-1	0	0	0	-1	-1	-1	0	-1	-1	0	-1
-1	0	0	0	-1	-1	1	0	-1	-1	1	0
-1	0	0	0	-1	-1	0	1	-1	-1	1	1
1	0	0	0	-1	1	0	-1	-1	1	-1	-1
1	0	0	0	-1	1	-1	0	-1	1	-1	1
1	0	0	0	-1	1	0	1	-1	1	0	0
1	0	0	0	-1	1	1	0	-1	1	1	-1
0	-1	0	0	1	-1	1	0	1	-1	-1	-1
0	-1	0	0	1	-1	0	1	1	-1	-1	1
0	-1	0	0	1	-1	-1	0	1	-1	0	1
0	-1	0	0	1	-1	0	-1	1	-1	1	0
0	1	0	0	1	1	1	0	1	1	-1	-1
0	1	0	0	1	1	-1	0	1	1	-1	1
0	1	0	0	1	1	0	1	1	1	0	-1
0	1	0	0	1	1	0	-1	1	1	1	0
0	0	-1	0	-1	0	-1	-1	-1	0	-1	-1
0	0	1	0	-1	0	-1	1	-1	0	-1	1
0	0	0	-1	-1	0	1	1	-1	0	0	0
0	0	0	1	-1	0	1	-1	-1	0	1	1
0	0	0	0	1	0	-1	-1	1	0	-1	0
0	0	0	0	1	0	1	1	1	0	0	-1
0	0	0	0	1	0	1	-1	1	0	1	-1
0	0	0	0	1	0	-1	1	1	0	1	1
0	0	0	0	0	-1	1	-1	0	-1	-1	-1
0	0	0	0	0	-1	1	1	0	-1	-1	0
0	0	0	0	0	-1	-1	-1	0	-1	0	1
0	0	0	0	0	-1	-1	1	0	-1	1	-1
0	0	0	0	0	1	1	-1	0	1	-1	0
0	0	0	0	0	1	1	1	0	1	0	1
0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	1	1	-1
0	0	0	0	0	1	-1	1	0	1	1	1

†Xem Vinning et al. (2005). Các ô lớn được cách ra một dòng.

trường hợp này đều nằm trong 60 trường hợp ở bảng 5 của JG (Bảng liệt kê trường hợp mà Macharia & Goos (2010) không tìm được EE-SPD hoặc các EE-SPD mới có chỉ số D_{eff} cao hơn). Số trường hợp thiết kế của JG không có mức giá trị nguyên là 16.

Một phần biện muốn biết các EE-SPD* tốt như thế nào khi so với các thiết kế SPD D -tối ưu. Trong các EE-SPD của SPLIT, 34 thiết kế của chúng tôi là EE-SPD*: 5 thiết kế được liệt kê trong bảng 3.7, 7 thiết kế có D -hiệu quả như các thiết kế cùng số nhân tố của JG (các thiết kế này của JG cũng là EE-SPD*) và các thiết kế còn lại có D -hiệu quả kém hơn một ít so với các thiết kế cùng số nhân tố của JG. Với các trường hợp cụ thể, nếu ta sử dụng các thiết kế đầu vào khác nhau thì SPLIT có thể cho các kết quả khác nhau. Các thiết kế đầu vào càng có nhiều mức trung tâm 0 thì khả năng nhận được các EE-SPD* sẽ cao hơn nhưng chỉ số hiệu quả D_{eff} thấp hơn.

3.6 Kết luận chương 3

EE-SPDs đã được nghiên cứu bởi Vining et al. (2005), Parker et al. (2006, 2007) và gần đây là Macharia & Goos (2010), Jones & Goos (2012). Tuy nhiên, người đọc cần chú ý rằng các SPD D -tối ưu (nhất là với các SPD không chứa các mức giá trị không nguyên) nhận được sự yêu thích hơn so với EE-SPD trừ phi các EE-SPD cũng là D -tối ưu hoặc gần D -tối ưu.

Nội dung của chương này đưa ra một thuật toán SPLIT nhanh và đơn giản xây dựng các EE-SPD 3-mức trong hầu hết các trường hợp. Sự khác biệt chính giữa EE-SPD của JG và của SPLIT là với SPLIT việc thiết lập các mức giá trị cho nhân tố WP và phân bố của các mức giá trị của mỗi nhân tố SP trong mỗi WP được thực hiện bởi người làm thí nghiệm. Các EE-SPD tạo bởi SPLIT thường là D -hiệu quả và có ma trận thông tin dạng đơn giản rất gần với phương trình 3.7. Điều này cho ta giải thích đơn giản về kết quả tính toán.

Thuật toán SPLIT được thực hiện bởi ngôn ngữ lập trình Java. Program sử dụng SPLIT cũng như các ma trận thiết kế đầu vào và đầu ra của mỗi trường hợp trình bày trong chương này là sẵn có từ các tác giả.

Bảng 3.7: Các chỉ số D_{eff} của các thiết kế EE-SPD của JG và SPLIT cho 25 trường hợp trong đó SPLIT cho kết quả tốt hơn.

Trường hợp	m_W	m_S	b	k	JG	SPLIT	Tỷ số(%)
25	1	2	5	3	80.5§	91.7	114.0
30	1	2	6	3	70.9	91.5	129.0
36	1	2	7	4	82.6	85.4‡	103.4
44	1	3	5	6	66.5	92.0	138.3
46	1	3	6	4	66.4	85.3	128.4
47	1	3	6	5	59.3†	96.2	162.2
48	1	3	6	6	37.8†§	90.2‡	238.4
66	2	1	10	4	90.8†	92.0	101.3
68	2	1	10	6	83.1†	97.9	117.8
69	2	1	11	2	90.9	91.5	100.6
71	2	1	11	4	91.2†	91.4	100.2
73	2	1	11	6	67.6†	97.4	144.0
74	2	1	12	2	80.3	91.8	114.3
76	2	1	12	4	94.2	94.7‡	100.5
78	2	1	12	6	47.5†	98.2‡	206.7
89	2	2	9	3	75.2†	90.6	120.5
94	2	2	10	3	44.5†§	92.5	207.8
95	2	2	10	4	50.2†	82.7	164.8
97	2	2	10	6	84.2†	95.1	112.9
99	2	2	11	3	38.5†	89.3	231.8
100	2	2	11	4	60.6†	88.4	145.9
101	2	2	11	5	66.3†	88.2	133.1
102	2	2	11	6	55.7†	93.2	167.3
109	2	3	8	6	44.9†	90.3‡	201.2
111	3	3	12	4	93.7	97.2	103.7

†Các thiết kế của JG chứa mức giá trị không là số nguyên.

‡Thiết kế mới là EE-SPD*.

§Chỉ số D_{eff} được tính lại theo $|\mathbf{M}_{\text{opt}}|$ của thiết kế D -tối ưu tạo ra bởi phần mềm JMP

Kết luận

Luận án đề xuất một số thiết kế bề mặt đáp ứng bậc hai cho các nhân tố 3-mức giá trị có tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao bao gồm các thiết kế Box-Behnken nhỏ và các thiết kế ước lượng tương đương SPLIT-PLOT. Các thiết kế Box-Behnken mới được xây dựng từ các thiết kế nhóm không đầy đủ. Chúng có số phép thử thí nghiệm là nhỏ hơn các thiết kế Box-Behnken cổ điển nên được gọi là thiết kế Box-Behnken nhỏ. Ngoài ra, các thiết kế này có thể chia nhóm trực giao. Đối với lớp các thiết kế SPLIT-PLOT, chúng tôi xây dựng thuật toán SPLIT để tạo ra các thiết kế ước lượng tương đương SPLIT-PLOT. Các thiết kế SPLIT-PLOT mới cải tiến 25 trường hợp của các tác giả Jones & Goos (2012) và Marchia & Goos (2010) theo chỉ số D_{eff} và mức giá trị thiết kế là số nguyên. Các thiết kế mới có ma trận thông tin dạng đơn giản nếu chúng có tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao hoặc gần với dạng đơn giản nên dễ giải thích các kết quả của mô hình.

Các kết quả chính mà luận án thu được bao gồm:

- (i) Các thiết kế Box-Behnken mới với số phép thử thí nghiệm ít hơn và có thể chia nhóm trực giao.
- (ii) Đóng góp vào danh sách các thiết kế SPLIT-PLOT với tính chất ước lượng tương đương và cải thiện một số kết quả của các tác giả trước.
- (iii) Xây dựng lớp các thiết kế thí nghiệm với tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao.

Các kết quả chính của luận án mới dừng lại ở mức độ xây dựng lý thuyết và là những thiết kế tốt để cho người làm thí nghiệm có thêm nhiều lựa chọn để thực hiện.

Luận án mở ra một số vấn đề có thể tiếp tục nghiên cứu:

- (i) Ứng dụng một trong số các thiết kế thí nghiệm này vào bài toán thực tế.
- (ii) Cải tiến các thiết kế APD với tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao.
- (ii) Nghiên cứu tiếp bài toán xây dựng các thiết kế thí nghiệm sàng lọc có tính chất hiệu ứng bậc hai trực giao. Các kết quả mới này đã được gửi ở hai tạp chí.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC CỦA TÁC GIẢ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

- [1] Tung-Dinh Pham & Nam-Ky Nguyen, 2014. Small Box-Behnken Designs With Orthogonal Blocks. *Statistics and Probability Letters*.(SCIE) 85, 84-90.
- [2] Nam-Ky Nguyen & Tung-Dinh Pham, 2015. Searching for D-efficient Equivalent-Estimation Second-Order Split-Plot Designs, *Journal of Quality Technology*.(SCI) 47, 54-65.